

修士論文

ラプラシアン行列の最大固有値に属
する固有ベクトルとグラフ構造の
関係性の検討

14892514 柴田 理史

指導教員 會田 雅樹 教授

2016 年 1 月

首都大学東京大学院 システムデザイン研究科
システムデザイン専攻 経営システムデザイン学域

文藝士附

固より固より大なるの固よりてこそその
の固よりてこそそのハイレハ固より
信の卦の卦

史聖 田樂 4729841

史聖 田樂 田會 史聖

民1系8105

固よりてこそそのハイレハ固より

目次

第 1 章	序論	1
1.1	研究背景	1
1.2	研究目的	3
1.3	構成	4
第 2 章	ラプラシアン行列の概要	5
2.1	ラプラシアン行列の基礎	5
2.2	ラプラシアン行列の固有値問題	9
2.3	代数的連結性とフィードラーベクトル	10
第 3 章	ラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルが表すグラフ構造の実験的考察	16
3.1	リンクの存在に関する予想と実験	16
3.2	リンクの存在に関する実験結果	18
第 4 章	最大固有値に属する固有ベクトルとグラフ構造の関係に関する予想	35
4.1	ラプラシアン行列の最大固有値に関する予想	35
4.2	パスグラフにおけるラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトル	36
第 5 章	結論	41
	謝辞	42
	参考文献	43

目次

1.1	ノードとリンクによって記述されたネットワーク	2
2.1	グラフ	6
2.2	長さ 2 のノード 0 からノード 4 への経路	7
2.3	ラプラシアン行列の例	8
2.4	代数的連結性	12
2.5	連結性の変化	13
2.6	3つのクラスタからなるグラフ	14
2.7	フィードラーベクトルの成分	15
3.1	グラフ C	17
3.2	モデル C 最大固有値に属する固有ベクトル	17
3.3	グラフモデル 1	18
3.4	モデル 1 最大固有値に属する固有ベクトル	18
3.5	グラフモデル 1.2	19
3.6	モデル 1.2 最大固有値に属する固有ベクトル	19
3.7	グラフモデル 1.3	20
3.8	モデル 1.3 最大固有値に属する固有ベクトル	20
3.9	グラフモデル 2	21
3.10	モデル 2 最大固有値に属する固有ベクトル	21
3.11	グラフモデル 3	22
3.12	モデル 3 最大固有値に属する固有ベクトル	22
3.13	グラフモデル 4	23
3.14	モデル 4 最大固有値に属する固有ベクトル	23
3.15	グラフモデル 5	24
3.16	モデル 5 最大固有値に属する固有ベクトル	24
3.17	グラフモデル 6	25

3.18	モデル 6 最大固有値に属する固有ベクトル	25
3.19	グラフモデル 7	26
3.20	モデル 7 最大固有値に属する固有ベクトル	26
3.21	グラフモデル 8	27
3.22	モデル 8 最大固有値に属する固有ベクトル	27
3.23	グラフモデル 9	28
3.24	モデル 9 最大固有値に属する固有ベクトル	28
3.25	グラフモデル 10	29
3.26	モデル 10 最大固有値に属する固有ベクトル	29
3.27	グラフモデル 11	30
3.28	モデル 11 最大固有値に属する固有ベクトル	30
3.29	グラフモデル 12	31
3.30	モデル 12 最大固有値に属する固有ベクトル	31
3.31	グラフモデル 13	32
3.32	モデル 13 最大固有値に属する固有ベクトル	32
3.33	グラフモデル 14	33
3.34	モデル 14 最大固有値に属する固有ベクトル	33
4.1	重み付きノードの集合	36
4.2	パスグラフの作成イメージ	37
4.3	ノード数 2 の重みの差の自乗和最大配置	37
4.4	ノード数 3 の重みの差の自乗和最大配置検討	37
4.5	ノード数 4 の重みの差の自乗和最大配置検討	38
4.6	ノード数 5 の重みの差の自乗和最大配置検討	38
4.7	ノード数 6 の重みの差の自乗和最大配置	39
4.8	ノード数 $2k$ の重みの差の自乗和最大配置	39
4.9	ノード数 $2k + 1$ の重みの差の自乗和最大配置	39
4.10	ノード数 $2k + 2$ の重みの差の自乗和最大配置	40

第1章

序論

1.1 研究背景

近年の情報通信ネットワーク技術の目覚ましい発展と普及に伴い、個人が場所や時間を問わずインターネットに接続できるデバイスを常に携帯することが当たり前になっている。また、ソーシャルネットワーキングサービスなどの利用の高まりによって巨大な社会ネットワークの構造を観測することが可能になっている [1]。そのような巨大で複雑なネットワークは複雑ネットワークと呼ばれ、複雑ネットワークを対象とした研究は一つの研究学問として多くの研究者を魅了し、情熱を注がせる対象である [2]。複雑ネットワークは数学、社会学、生物学など様々な分野から研究対象としてアプローチされている [3, 4]。その中でも、グラフ理論を基礎としたネットワーク分析に対するアプローチはネットワークグラフの普遍的な性質を明らかにするのに効果的な手法である [5, 6, 7]。

グラフ理論でのグラフとは、ノード (点) とリンク (辺) によってネットワークを記述したものである (図 1.1)。グラフ理論は 1736 年にオイラーがケーニヒスベルク問題を証明する際にグラフを用いたことによって切り開かれた分野である [8, 9]。グラフ理論によってグラフの解析的な取り扱いが可能になり、1959 年にエルデシュとアルフレッド・レーニイが考案したランダムグラフ (ER モデル) などは興味深い性質を有していた [10]。

一方で、現実社会のネットワークの構造 (社会ネットワーク) を探る研究は社会学分野を中心に行われた。1960 年代にハーバード大学の社会心理学者ミルグラムによる大量のサンプル実験によってスモールワールド現象を確認した実験が行われた。この実験は全く面識のない二人が何人の知人を辿っていくとつながることができるかを調べた社会実験で、平均で 6 人の知人を介するだけでつながることができるという結果を得た。これは「六次の隔たり」といわれ、最も有名なスモールワールド現象の一例である [11]。

また 1970 年代にハーバード大学の大学院生のグラノヴェッターの転職に関する実験によっても社会ネットワーク分析は発展をみせた。これは、人々が職探しをする際に有効な紹介者、情

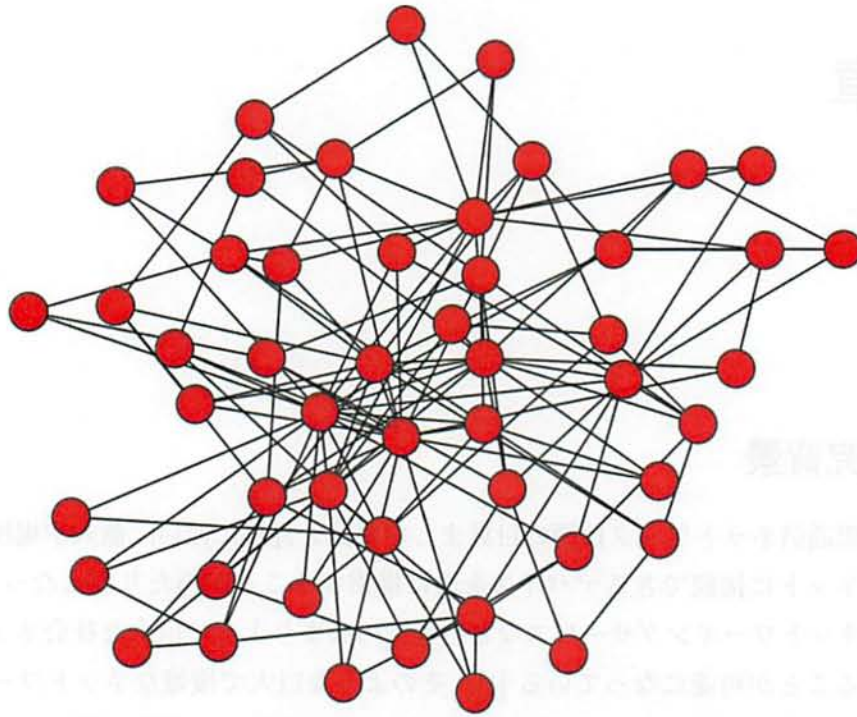


図 1.1: ノードとリンクによって記述されたネットワーク

報提供者となることが多いのは、家族や会社の同僚のような普段親密に接している身近な人間とのつながりである「強い紐帯」ではなく、学生時代の古い友人や取引先の数回しか話したことのないような普段あまり接すること無い人間とのつながりである「弱い紐帯」であることを明らかにした。これは「弱い紐帯の強み」と言われる [12]。

社会学分野で様々な社会ネットワークに共通する性質が発見される一方で、1990 年代にコーネル大学の大学院生のワッツと同大学教官のストロガッツによって「ワッツ・ストガッツモデル」(WS モデル) というグラフの数学モデルが考案される。これはスモールワールド現象への理論的な解析を試みることを可能にしたそれ以前にはない数学的手法を取り入れた研究である。これは現実社会の様々なネットワークに対して共通な性質である、スモールワールド性と「友達の友達は友達」といったクラスタ性の両方の性質を満たす数学モデルである [13]。このモデルの構築は様々な分野でのネットワークを考える上で大きな注目を集め、複雑ネットワークの研究、グラフ理論においてひとつのプレイクスルーとなった。

さらに、ほぼ同時期にバラバシによって「バラバシ・アルバートモデル」(BA モデル) が考案される。現実の複雑ネットワークがもつスモールワールド性とクラスタ性以外の重要な性質であるスケールフリー性をもつグラフの数学モデルである [14]。スケールフリー性とはグラフの次数分布に関する性質である。グラフの次数とは各ノードがもつリンク数である。グラフの次数 k と正の定数 α とすると、次数分布 $P(k)$ が $P(k) \propto k^{-\alpha}$ に比例するときスケールフリー性をもつ (スケールフリーグラフ)。スケールフリー性を有するネットワークは様々な具体例が見つかっている。男女の性的関係、WWW、学術論文の共同執筆数などであり、このモデルは前述の WS モデルに比べ、社会学的なネットワーク構造の観点から意義の強いモデルであるといえる。

WS や BA モデルのもつ性質はネットワークの性質は社会ネットワーク以外の様々な分野の大規模複雑ネットワークにも確認され、様々なネットワーク研究の基礎となっている。グラフ理論は生物学、化学、物理学、社会学など、分野を問わず様々なネットワークを考える上で応用されている [21, 22, 23]。

1.2 研究目的

スペクトルグラフ理論ではラプラシアン行列と呼ばれるネットワークのグラフ構造を含んだ行列の固有値、固有ベクトルがグラフ分析に利用される [15]。行列の固有値や固有ベクトルを利用したグラフ分析の基礎はホフマンとドナートらによって考案された [16]。

スペクトルグラフ理論では 0 でない最小固有値と固有ベクトルがグラフの連結性を示す指標として知られている。例えば、第 2 章でも論じるが、ラプラシアン行列の最小の固有値は 0 になり、最小固有値の重複数がグラフの連結数に一致することが知られている。さらに、2 番目に小さい 0 でない固有値に属する固有ベクトルはフィードラーベクトル (Fiedler vector) と呼ばれる。フィードラーベクトルを分析することで特定のリンクを抽出することができる [17, 18, 19]。フィードラーベクトルはグラフのクラスタ構造を抜き出すことができ、グラフ分割問題にも応用される [20]。

また、フィードラーベクトルによって抽出できるリンクは社会ネットワーク分析に利用され、上述した社会学的に重要なクラスタ間を結ぶリンク (弱い紐帯) の特定に利用することができる。

ラプラシアン行列の小さな固有値やフィードラーベクトルを用いた社会ネットワーク分析への応用が進んでいる一方で、ラプラシアン行列の大きな固有値やそれに属する固有ベクトルの社会ネットワーク分析への応用は十分に行われていないといえる。それは、未だにラプラシアン行列の固有値や固有ベクトルの性質と対応する社会ネットワークを記述したグラフ構造との関係の理解が不十分な為だと考えられる。

そこで、本稿ではラプラシアン行列の正の最大固有値に属する固有ベクトルを分析し、実際

のグラフ構造との関係を明らかにすることを目的とする。

1.3 構成

本論文の構成は以下の通りである。第2章では、ラプラシアン行列の概要について述べ、ネットワークグラフを代数的に取り扱う方法を述べる。またラプラシアン行列の固有値や固有ベクトルを分析することで得られるグラフの性質についても述べる。さらにラプラシアン行列の固有値問題とラプラシアン行列の二次形式の関係について論じる。第3章では、ラプラシアン行列の固有値問題を踏まえ、ラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルがどのようなグラフの構造を表しているかを実験によって調査した結果を示す。第4章では、ラプラシアン行列の固有値問題とパスグラフのノードの重みの最適配置を証明を行う。第5章に結論を述べる。

第 2 章

ラプラシアン行列の概要

本章では，本稿で用いるラプラシアン行列の定義や性質について [15] に基づき述べる．次に，ラプラシアン行列のスペクトルとノードの重みの関係に関して述べる．

2.1 ラプラシアン行列の基礎

2.1.1 ラプラシアン行列の定義

グラフを代数的に扱う方法の一つとして行列を用いてグラフ構造を表現する方法が存在する．本稿では無向グラフを分析に用いる．無向グラフを G とし， n 個のノードの集合を $V = \{0, 1, \dots, n-1\}$ ，リンクの集合を E とする．ノード i からノード j をつなぐリンクが存在するとき $(i, j) \in E$ である．このとき隣接行列 (adjacency matrix) A は以下のように定義される．

$$A_{ij} = \begin{cases} 1 & \text{if } (i, j) \in E \\ 0 & \text{otherwise} \end{cases} \quad (2.1)$$

隣接行列はグラフ G のリンク情報を記述した行列である．例えば A^k ($k = 0, 1, 2, 3, \dots$) の (i, j) 成分は，グラフ G 上のノード i からノード j への長さ k の経路数を表している．図 2.1 のようなグラフのノード 0 からノード 4 への長さ 2 の経路数は図 2.1 の隣接行列の式 2.3 の $(1, 5)$ 成分を見れば知ることができる．式 2.3 の $(1, 5)$ 成分は 3 なのでノード 0 からノード 4 への長さ 2 の経路数は 3 である．実際の経路は図 2.2 である．

$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 1 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 1 & 1 & 0 \end{pmatrix} \quad (2.2)$$

$$A^2 = \begin{pmatrix} 3 & 1 & 1 & 0 & 3 \\ 1 & 3 & 2 & 2 & 1 \\ 1 & 2 & 3 & 2 & 1 \\ 0 & 2 & 2 & 2 & 0 \\ 3 & 1 & 1 & 0 & 3 \end{pmatrix} \quad (2.3)$$

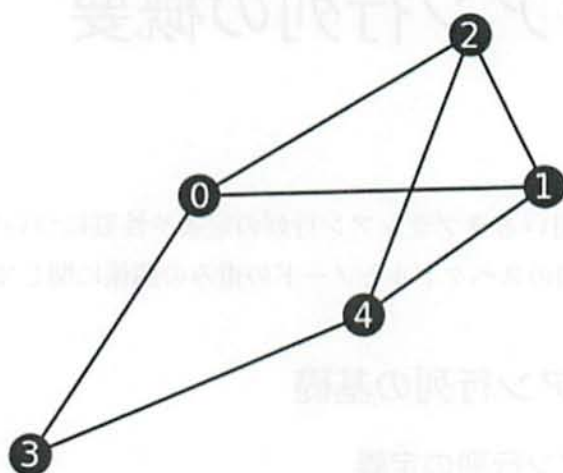
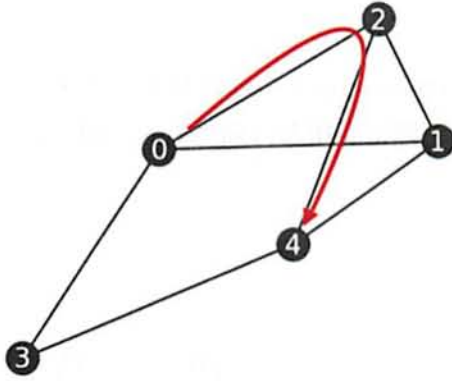
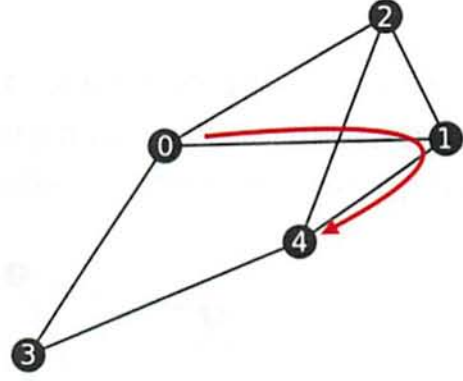


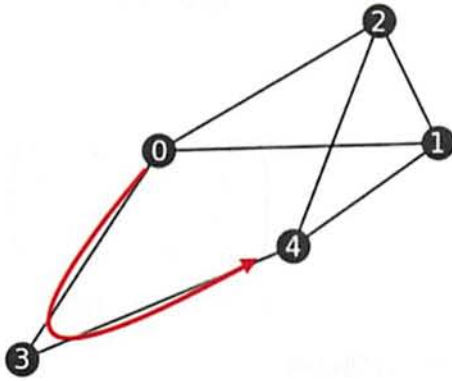
図 2.1: グラフ



(a) 経路 1



(b) 経路 2



(c) 経路 3

図 2.2: 長さ 2 のノード 0 からノード 4 への経路

このように、隣接行列はグラフの性質を代数的に調べることに利用可能である。

次に、ノード i ($i = 0, 1, \dots, n-1$) の次数を d_i としたとき、次数行列 (degree matrix) D は以下のように定義される。

$$D_{ij} = d_i \delta_{ij} \quad (2.4)$$

δ_{ij} はクロネッカーのデルタで、

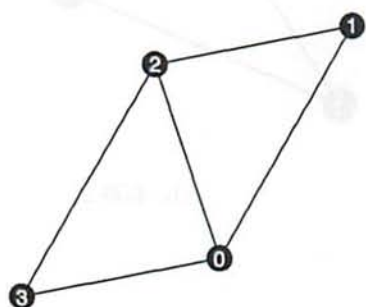
$$\delta_{ij} = \begin{cases} 1 & (i = j) \\ 0 & (i \neq j) \end{cases}$$

となる関数であり、単位行列 I の成分である。

以上の隣接行列と次数行列からラプラシアン行列 L は以下のように定義される。

$$L := D - A \quad (2.5)$$

ラプラシアン行列はグラフラプラシアン (graph laplacian) と呼ばれる。ラプラシアン行列も隣接行列同様に、グラフの性質を代数的に調べる際に有用な行列である。図 2.3 はノード数 4 のグラフからなるラプラシアン行列の例である。



$$A = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \\ 1 & 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$

(b) 隣接行列

$$D = \begin{pmatrix} 3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 3 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 2 \end{pmatrix}$$

(c) 次数行列

$$L = \begin{pmatrix} 3 & -1 & -1 & -1 \\ -1 & 2 & -1 & 0 \\ -1 & -1 & 3 & -1 \\ -1 & 0 & -1 & 2 \end{pmatrix}$$

(d) ラプラシアン行列

図 2.3: ラプラシアン行列の例

2.1.2 ラプラシアン行列の性質

無向グラフから定義されるラプラシアン行列は実対称行列となる。実対称行列の性質として以下のものがある。

- 固有値は、重複する（縮退する）場合でも区別して数えれば、全て実数で n 個存在する。
- 異なる固有値に属する固有ベクトルは直交する。
- 同じ固有値に属する固有ベクトルも、適当な方法で直交化することができ、 n 本の長さ 1 の固有ベクトルは n 次元空間の正規直交基底を張る。

さらにラプラシアン行列の他の性質を以下に示す。

ラプラシアン行列の 0 固有値の重複（縮退）について、以下の式

$$Lx = \lambda x \quad (2.6)$$

について考察する．ラプラシアン行列の定義より，各行の行和が 0 になるので， $\mathbf{x} = {}^t(1, 1, 1, \dots, 1)$ は固有値 0 の固有ベクトルである．グラフ G が非連結であるとき，ラプラシアン行列の成分を連結成分ごとにブロック対角化できるので，固有値 0 の重複数はグラフ G の連結成分数に等しくなる．

また，固有値の範囲について，ラプラシアン行列の固有値は全て 0 以上の実数で与えられ，以下のように示すことができる．ノード i ($i = 0, 1, \dots, n-1$) に重み x_i を与え，隣接するノード (i, j) の重みの差 $(x_i - x_j)$ を考える．グラフ G 全体での重みの差の自乗和を以下のように定義する．

$$F(\{x_i\}) := \sum_{(i,j) \in E} (x_i - x_j)^2 \geq 0 \quad (2.7)$$

和の範囲 (i, j) は G の全てのリンクに関する和を表す．次に各ノードの重みを成分にもつ列ベクトル \mathbf{x} を以下のように定義する．

$$\mathbf{x} := {}^t(x_0, x_1, x_2, \dots, x_{n-1}) \quad (2.8)$$

ここで ${}^t(\cdot)$ は転置を表している．また， $2x_i x_j = x_i x_j + x_i x_j$ と分解すると

$$\begin{aligned} F(\{x_i\}) &= \sum_{(i,j) \in E} ((x_i)^2 + (x_j)^2 - 2x_i x_j) \\ &= \sum_{i \in E} d_i (x_i)^2 - \sum_{(i,j) \in E} x_i x_j - \sum_{(i,j) \in E} x_j x_i \end{aligned}$$

すなわち $F(\{x_i\})$ はラプラシアン行列の二次形式 (quadratic form) で

$$F(\{x_i\}) = {}^t \mathbf{x} L \mathbf{x} \quad (2.9)$$

と記述できる．式 (2.7) からラプラシアン行列 L は固有値が全て非負である非負定値行列 (non-negative define) である．

2.2 ラプラシアン行列の固有値問題

本節では，本稿の分析の主題であるラプラシアン行列の最大の固有値に属する固有ベクトルと式 (2.7) の対応関係について述べ，本稿の主題でもあるラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルを分析する意義について論じる．

ノードの重みを成分にもつベクトル \mathbf{x} の大きさを $|\mathbf{x}| = 1$ とした制約条件下における

$F(\{x_i\})$ の停留値問題を考える．ラグランジュ未定乗数法を導入し

$$\begin{aligned}\Phi(\mathbf{x}, \lambda) &:= F(\{x_i\}) - \lambda \left(\sum_{i \in V} x_i^2 - 1 \right) \\ &= \sum_{(i,j) \in E} (x_i - x_j)^2 - \lambda \left(\sum_{i \in V} x_i^2 - 1 \right)\end{aligned}$$

を定義し， $\partial\Phi/\partial x_i = 0$ と $\partial\Phi/\partial\lambda = 0$ を解けばよい．ここで λ はラグランジュの未定乗数である．

$$\begin{aligned}\frac{\partial\Phi(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial x_i} &= \sum_{j \in \partial i} 2(x_i - x_j) - 2\lambda x_i = 0 \\ \frac{\partial\Phi(\mathbf{x}, \lambda)}{\partial \lambda} &= \sum_{i \in V} x_i^2 - 1 = 0\end{aligned}$$

ここで， ∂i はノード i の隣接ノードの集合である．整理すると

$$\sum_{j \in \partial i} (x_i - x_j) = \lambda x_i, \quad \sum_{i \in V} x_i^2 = 1$$

さらに

$$\sum_{j \in \partial i} (x_i - x_j) = D_i x_i - \sum_{j \in \partial i} x_j = \lambda x_i$$

となるので，ラプラシアン行列を用いると制約条件 $|\mathbf{x}| = 1$ のもとで

$$L\mathbf{x} = \lambda\mathbf{x} \tag{2.10}$$

を満たす λ と \mathbf{x} を求める問題に，すなわちラプラシアン行列の固有値問題に帰着する．ラグランジュの未定乗数 λ はラプラシアン行列の固有値になっており，最大固有値と最小固有値はそれぞれ $F(\{x_i\})$ の最大値と最小値に対応する．また，式 (2.10) を満たす \mathbf{x} は固有値 λ に属する固有ベクトルである．

本稿では，ラプラシアン行列の最大固有値とそれに属する固有ベクトルについてグラフ構造との関係を調査する実験を行う．また，関数 $F(\{x_i\})$ とラプラシアン行列の固有値問題との対応関係によって実験結果の理論的考察を行い，ラプラシアン行列の固有ベクトルとグラフ構造との対応関係を明らかにする．

2.3 代数的連結性とフィードラーベクトル

本節では，ラプラシアン行列の固有ベクトルを用いたグラフ構造の分析例として，「代数的連結性」とラプラシアン行列の 0 でない最小固有値とそれに属する「フィードラーベクトル」

と呼ばれる固有ベクトルに関して述べ、ラプラシアン行列の小さい固有値に属する固有ベクトルの分析例とグラフ構造の関係について紹介する。

ある無向グラフ G について考える。 G ラプラシアン行列の固有値を小さい順に番号をつけて

$$0 = \lambda_0 \leq \lambda_1 \leq \lambda_2 \leq \cdots \leq \lambda_{n-1}$$

とする。もしグラフ G が連結である場合、ラプラシアン行列の固有値 0 の重複数は 1 、 $\lambda_0 = 0$ 、 $\lambda_1 > 0$ となる。この λ_1 とそれに属する固有ベクトルに関して、グラフの連結性を変化させたときの値の変化を分析する。

仮に、リンクを除去することによってグラフ G を 2 つに分割したとする。するとグラフの連結成分は 2 であり $\lambda_1 = 0$ となるはずである。強固に結びついたグラフでは λ_1 の値は大きく、 2 つのクラス同士を結ぶリンクが 1 本しかないような分割が容易に行えるグラフでは λ_1 が小さくなる。つまり、 λ_1 はグラフの連結の強さを表す指標としてみなすことができる。連結であるグラフの 0 でない最小固有値 λ_1 は代数的連結性 (algebraic connectivity) と呼ばれる [17]。

図 2.4 は図 2.5 のようにグラフの連結性の強さを変化させたときの代数的連結性 λ_1 の値の変化を示したものである。連結性の強さに応じて λ_1 が変化しており、最終的に完全に分割されたグラフでは代数的連結性の値が 0 になる様子を示している。

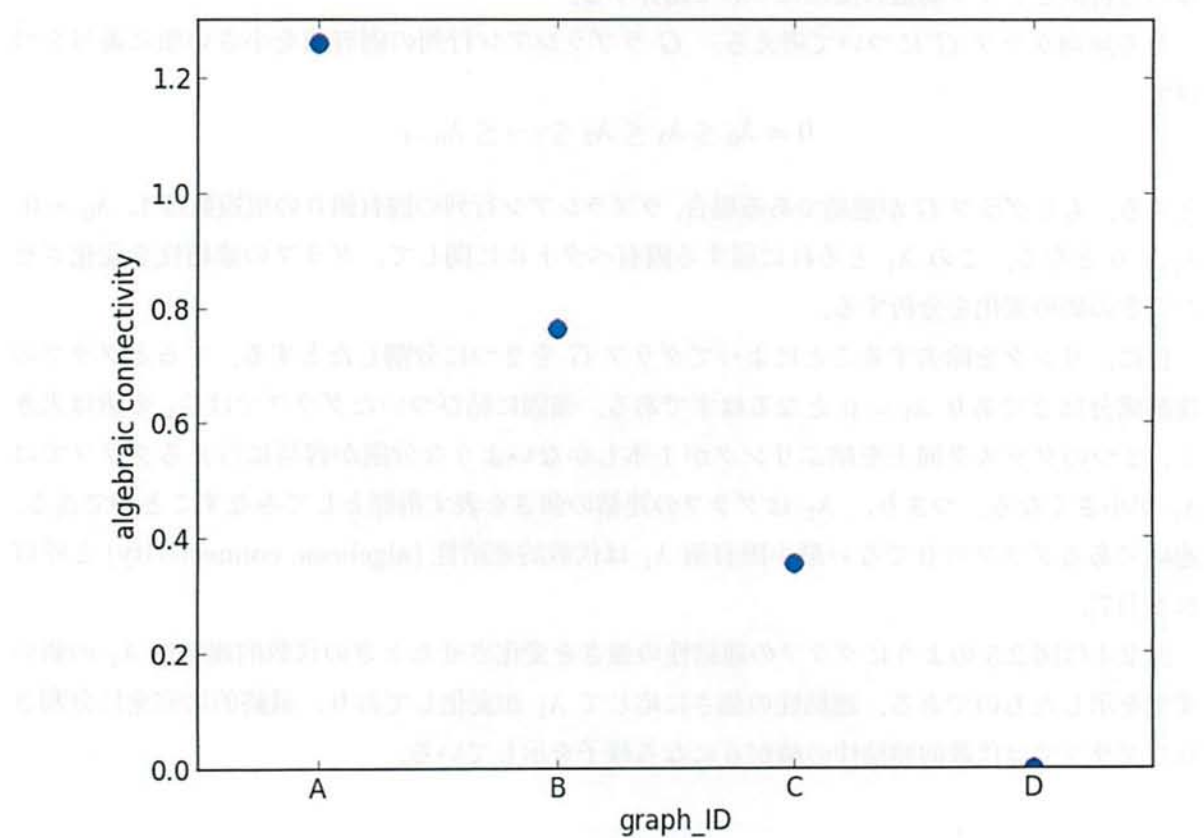
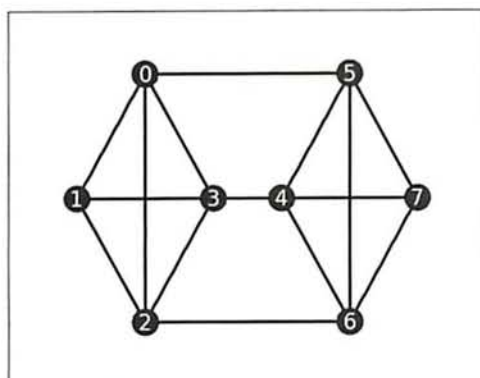
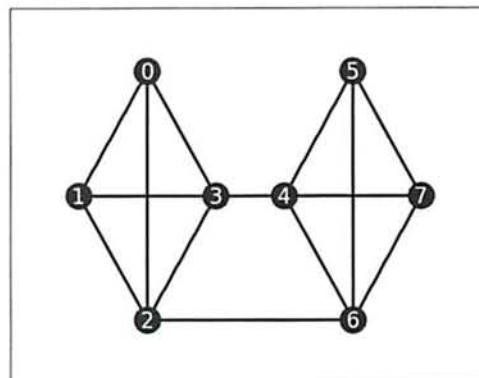


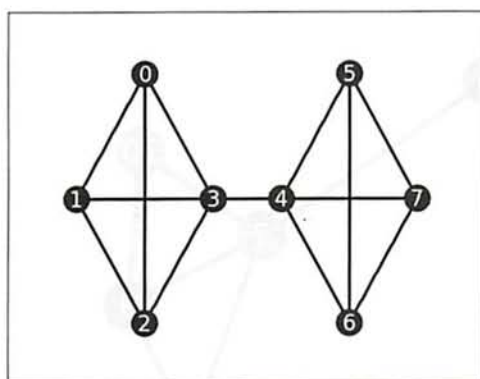
図 2.4: 代数的連結性



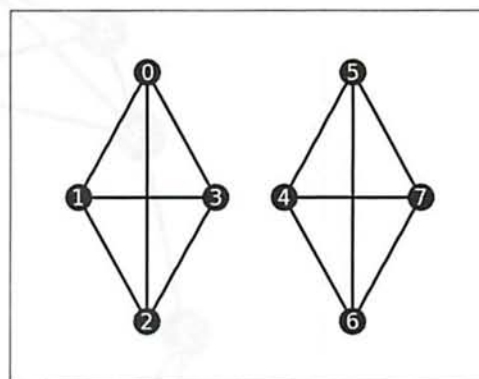
(a) グラフ A



(b) グラフ B



(c) グラフ C



(d) グラフ D

図 2.5: 連結性の変化

また、 λ_1 に属する固有ベクトルはフィードラーベクトルと呼ばれる。フィードラーベクトルを分析することでクラスタ構造を抽出したり、クラスタ間を結ぶリンクを特定することができる。図 2.6, 2.7 はフィードラーベクトルの分析例である。図 2.6 のグラフに対するフィードラーベクトルの計算結果が図 2.7 であり、ベクトル成分を各ノードの対応して並べたものである。ベクトル成分は 3 つのグループに分かれている。図 2.7 のフィードラーベクトルによるグループが図 2.6 のクラスタ群に対応している。

グラフ構造の観点ではフィードラーベクトルを利用した分析が広く知られ、グラフ分割は画像処理などの様々な分野に応用されている [24]。

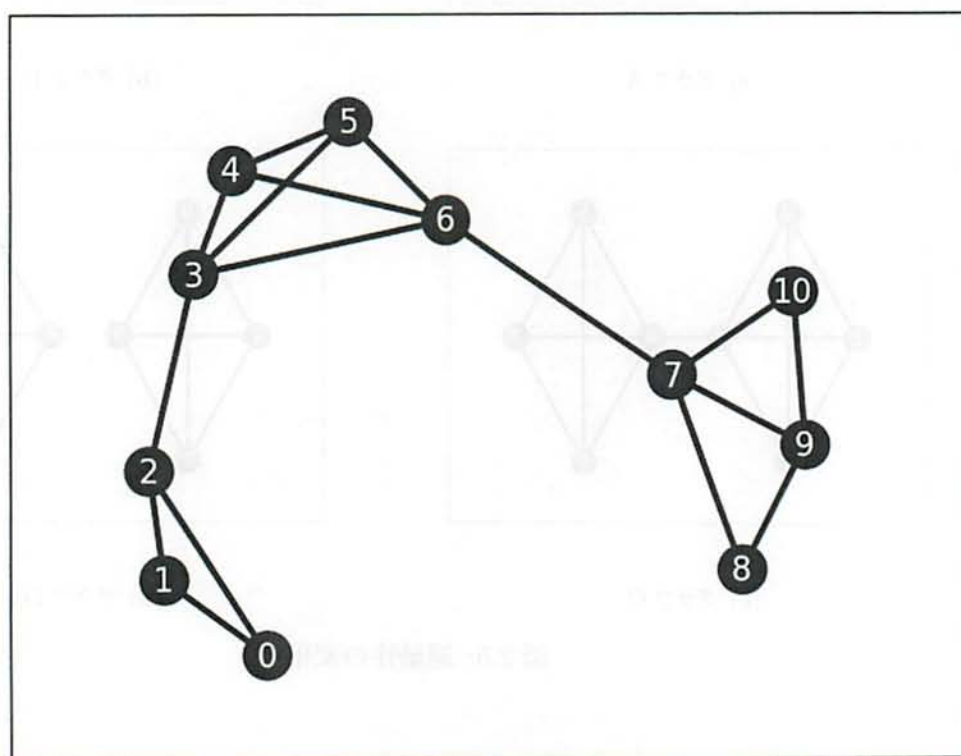


図 2.6: 3つのクラスタからなるグラフ

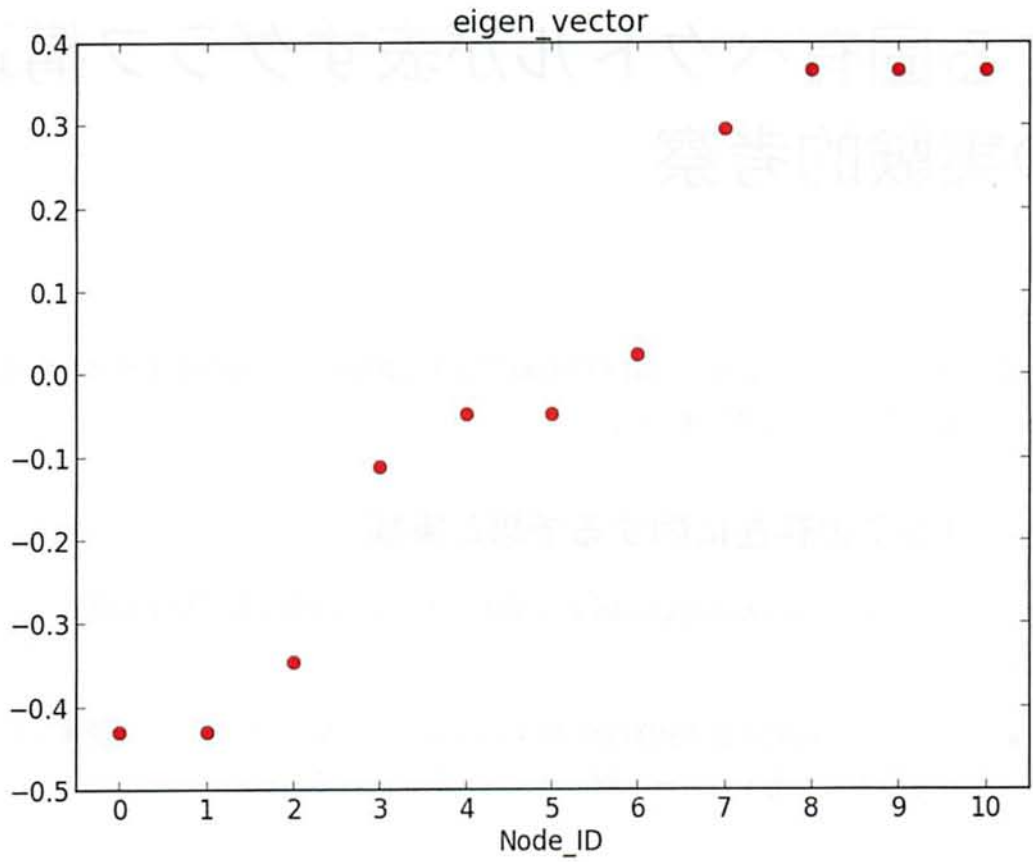


図 2.7: フィードラーベクトルの成分

第3章

ラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルが表すグラフ構造の実験的考察

本章では、ラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルが表すグラフ構造を実験によって調査、考察した結果を述べる。

3.1 リンクの存在に関する予想と実験

ラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルの性質として以下の性質が成り立つと予想した。

- ラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルについて、その要素が最大と最小となる要素に対応するノード間にはリンクが存在している。

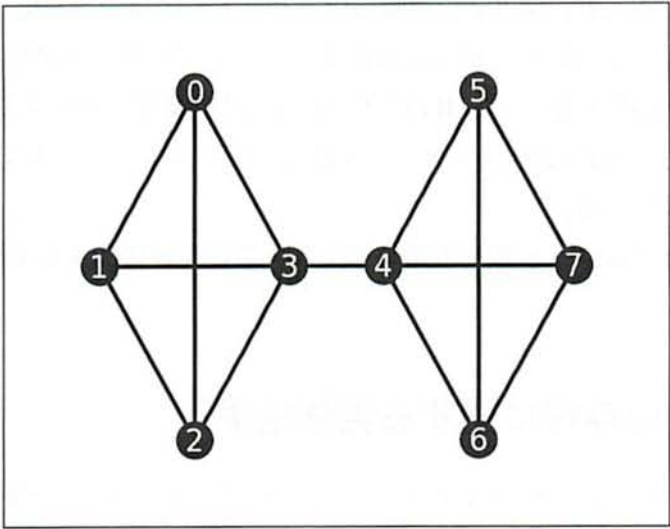


図 3.1: グラフ C

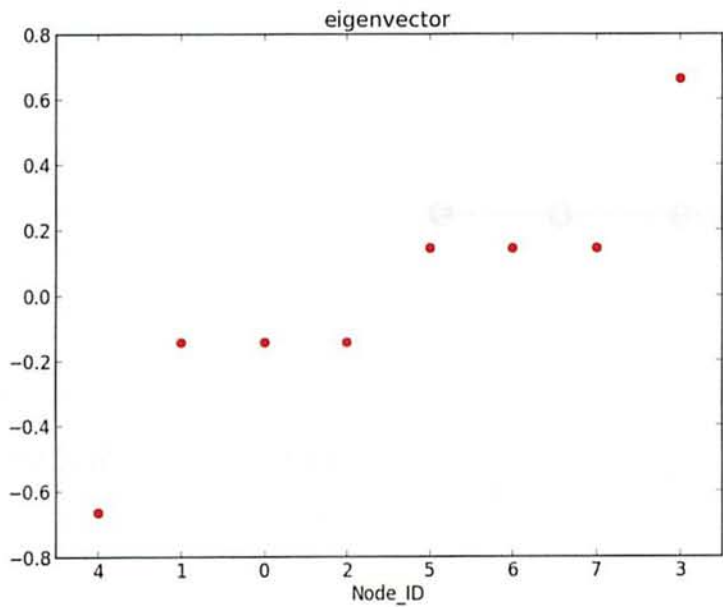


図 3.2: モデル C 最大固有値に属する固有ベクトル

図 3.1 のグラフを用いて実験の手順と見方について説明する。図 3.1 のグラフに対応するラプラシアン行列を作り，最大固有値に属する固有ベクトルを計算する (数値計算には Python

の拡張モジュール NumPy で行った). 図 3.2 は計算した固有ベクトルをソートしてプロットしたものである. ただし, 図 3.2 の横軸は固有ベクトルの要素と対応するノードの ID である. その固有ベクトル要素の最大と最小に対応するノード間にリンクが存在するかを確認する. 図 3.2 の最大要素に対応するノード ID はノード 3, 最小要素に対応するノード ID は 4 である. 図 3.1 で確認すると実際に固有ベクトルの最大と最小要素のノード 3-4 間にリンクが存在していることが確認できる.

以上のように様々なノード数やトポロジでリンクの存在に関する実験を行った結果を次節で示す.

3.2 リンクの存在に関する実験結果

本節では 3.1 節に従い, 様々なグラフでラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルの最大と最小要素に対応するノード間にリンクが存在することを確認した実験結果を示す. 実験はそれぞれ, ノード数やトポロジの異なる 15 のグラフに対して行った.

図 3.3~図 3.33 は実験を行った 15 のグラフとそれぞれの最大固有値に属する固有ベクトルをプロットした結果である. また実験結果の確認項目を表 3.1 にまとめた.

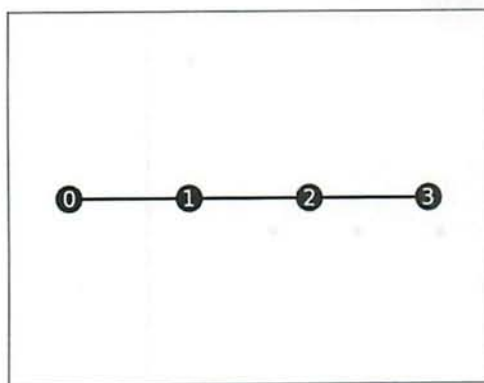


図 3.3: グラフモデル 1

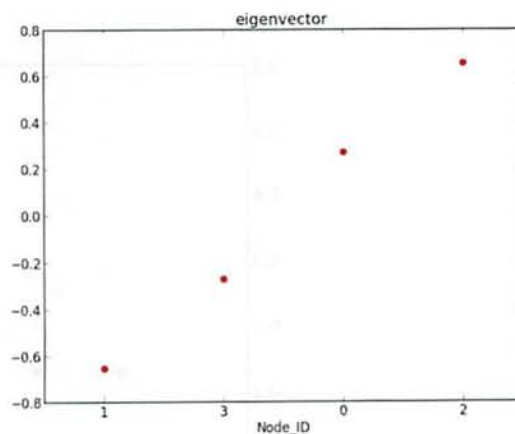


図 3.4: モデル 1 最大固有値に属する固有ベクトル

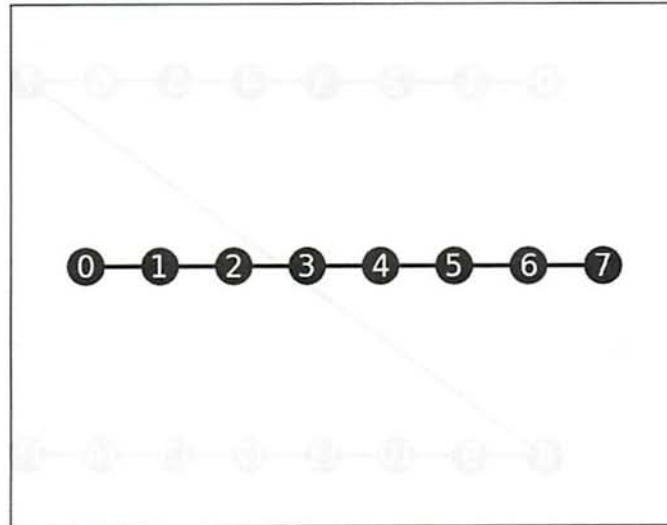


図 3.5: グラフモデル 1.2

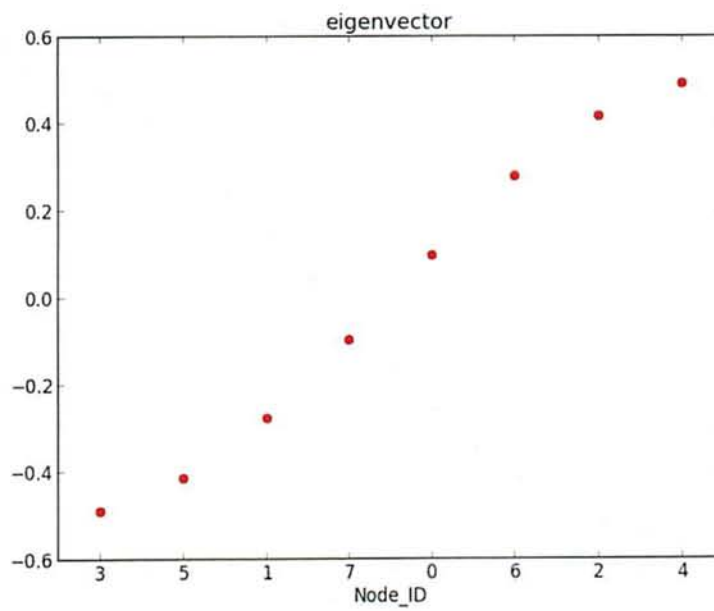


図 3.6: モデル 1.2 最大固有値に属する固有ベクトル

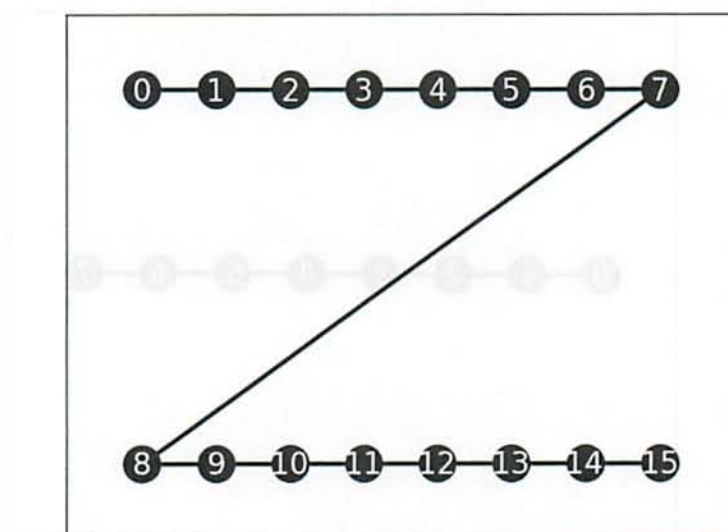


図 3.7: グラフモデル 1.3

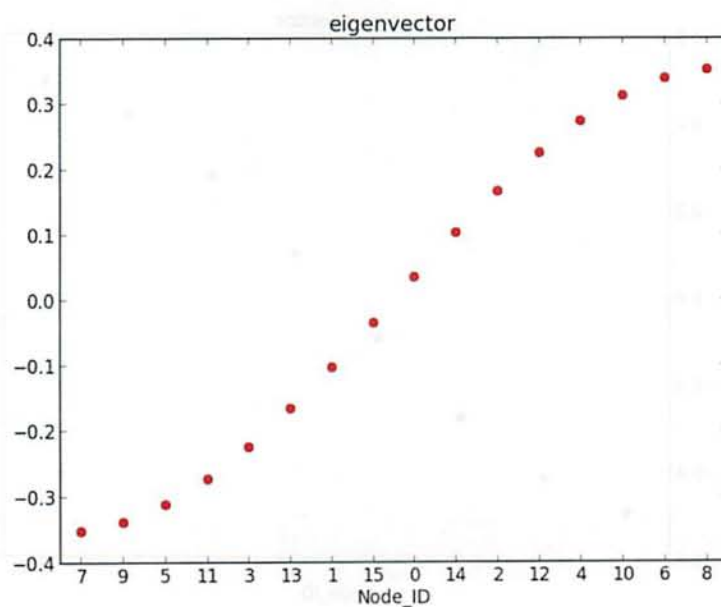


図 3.8: モデル 1.3 最大固有値に属する固有ベクトル

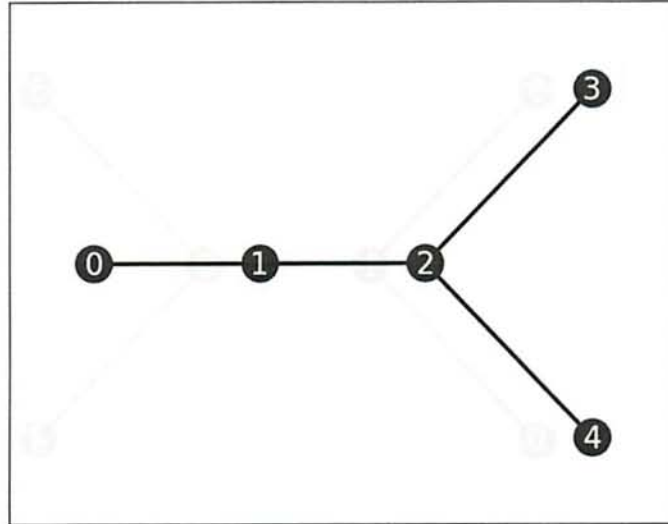


図 3.9: グラフモデル 2

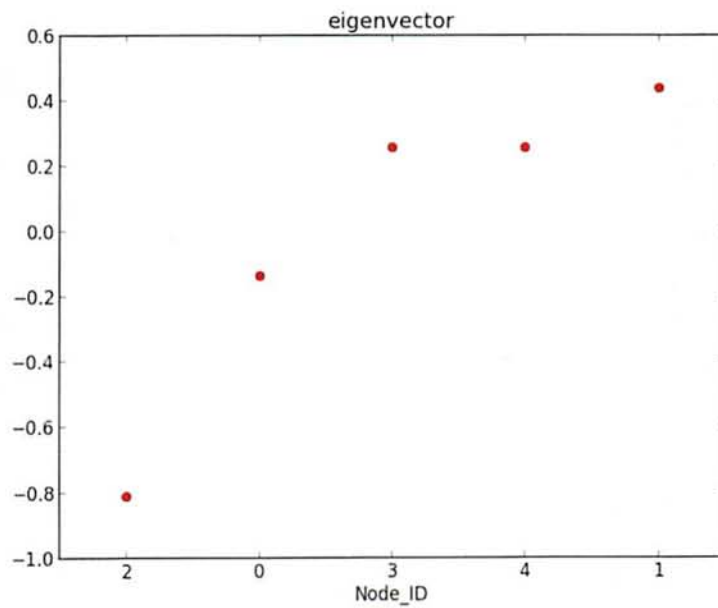


図 3.10: モデル 2 最大固有値に属する固有ベクトル

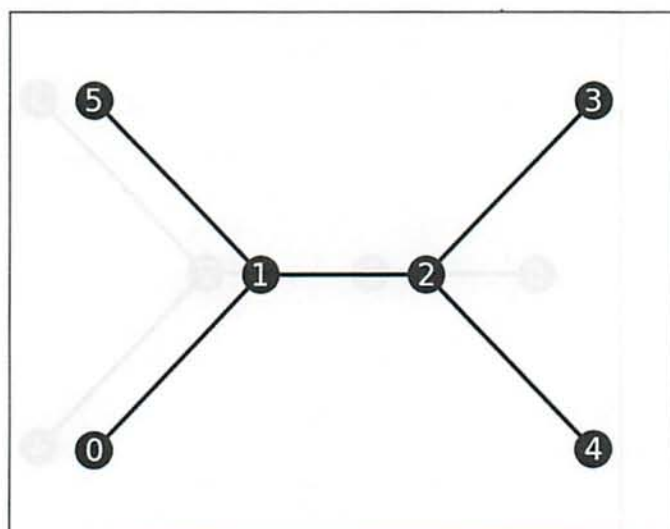


図 3.11: グラフモデル 3

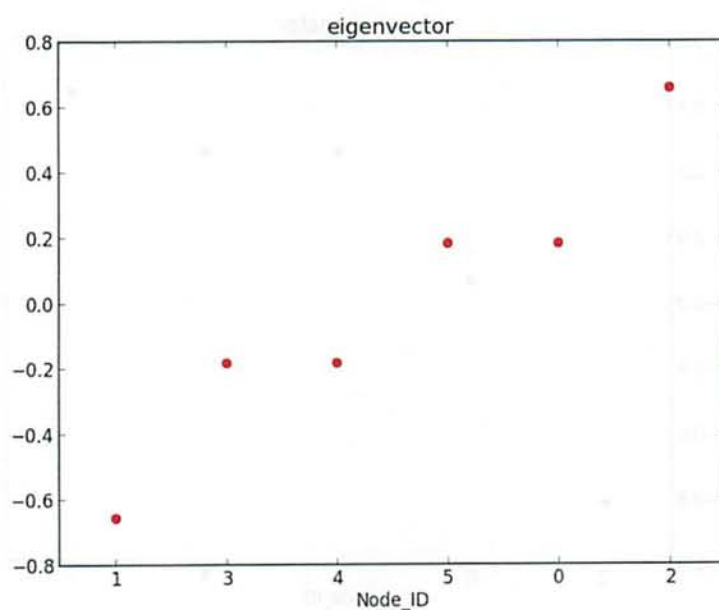


図 3.12: モデル 3 最大固有値に属する固有ベクトル

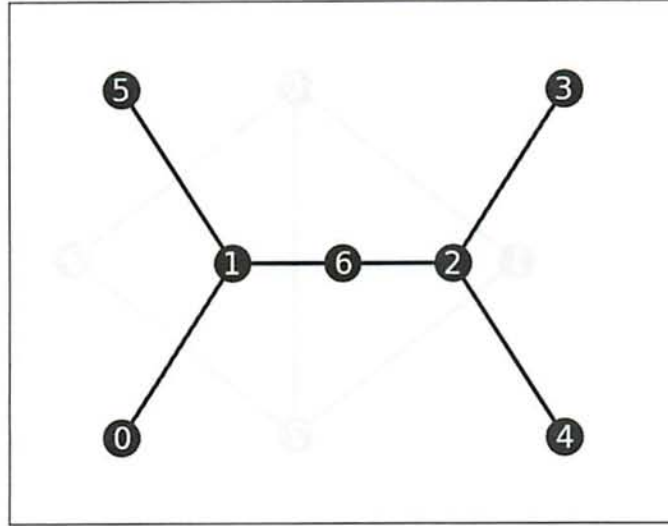


図 3.13: グラフモデル 4

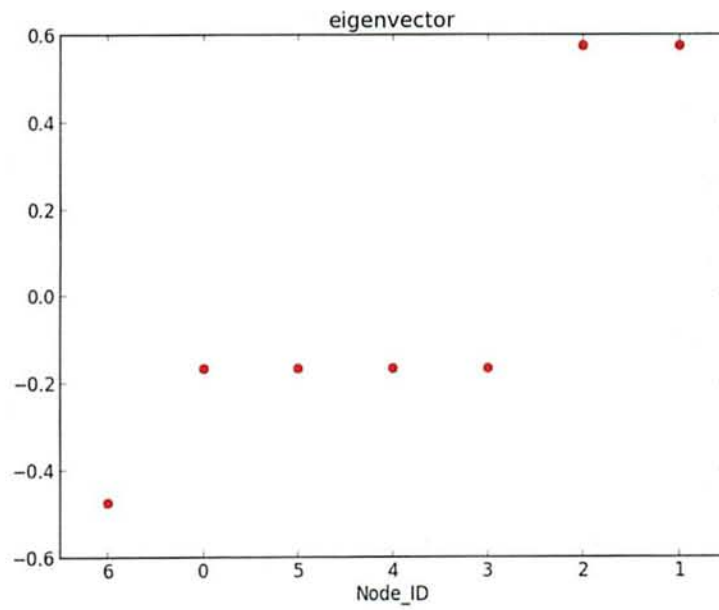


図 3.14: モデル 4 最大固有値に属する固有ベクトル

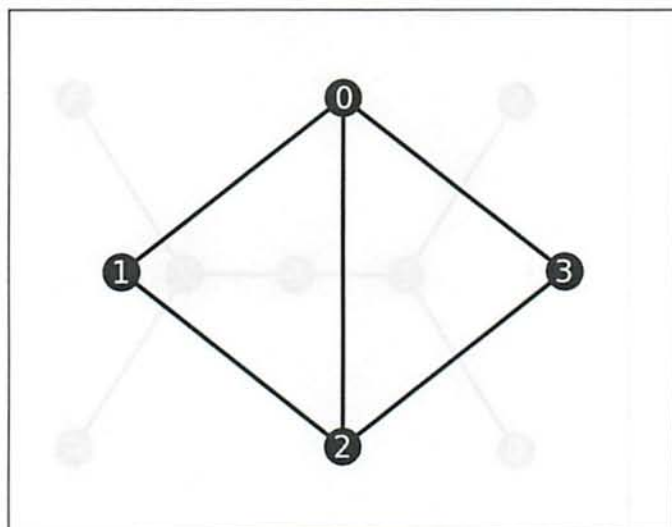


図 3.15: グラフモデル 5

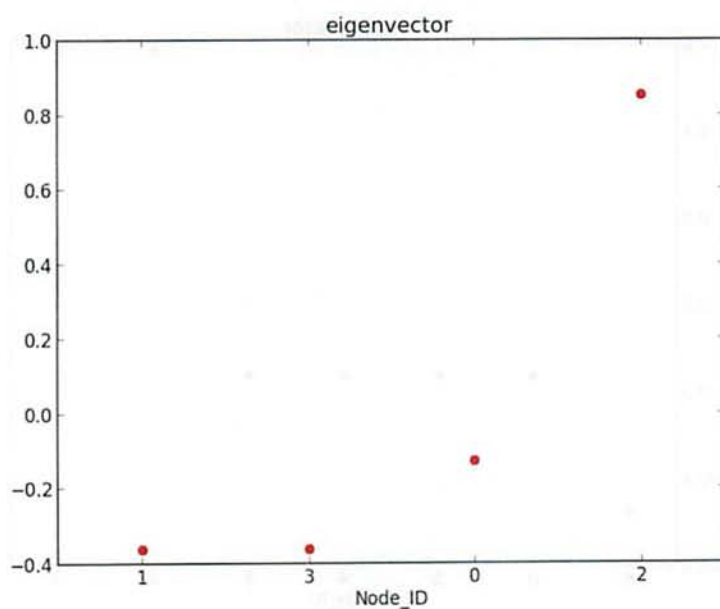


図 3.16: モデル 5 最大固有値に属する固有ベクトル

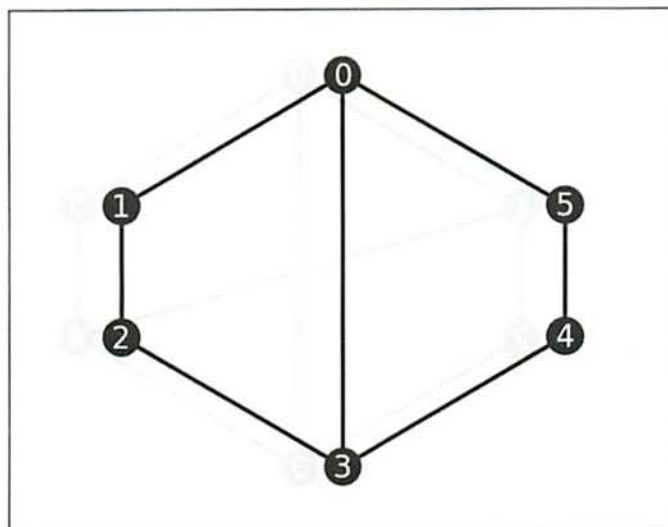


図 3.17: グラフモデル 6

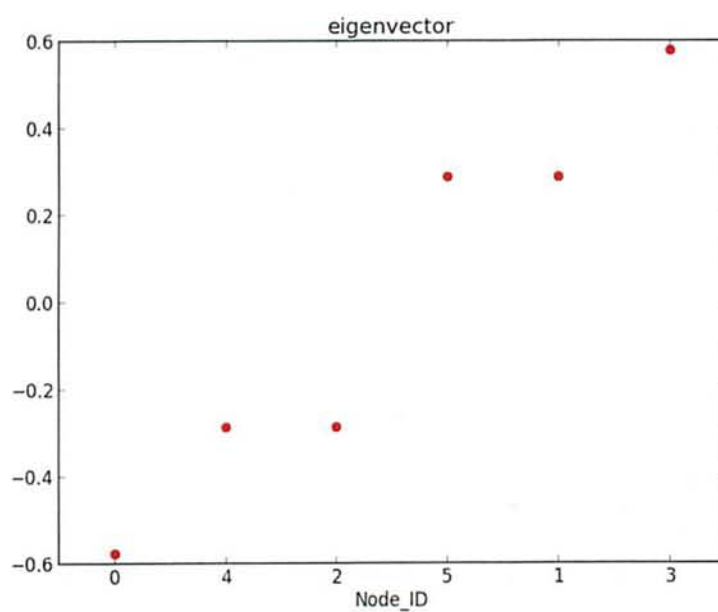


図 3.18: モデル 6 最大固有値に属する固有ベクトル

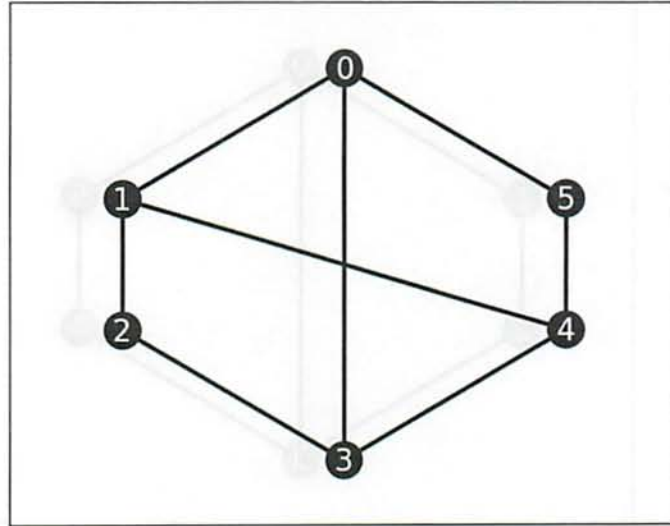


図 3.19: グラフモデル 7

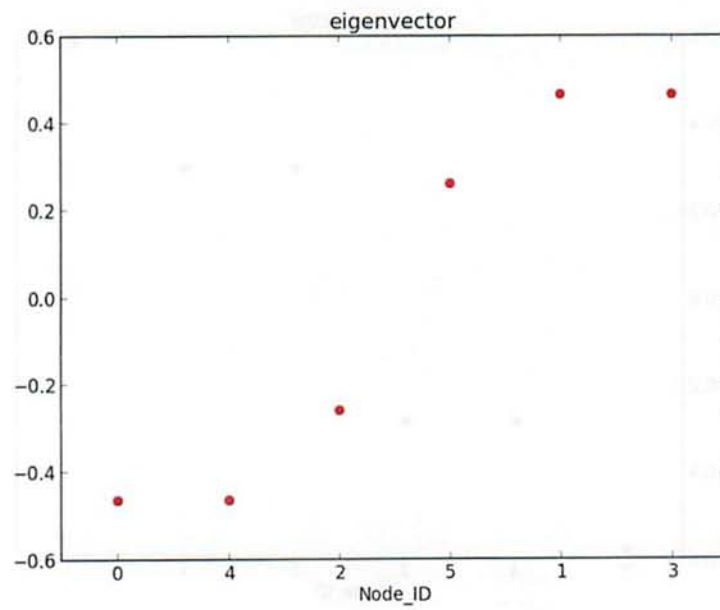


図 3.20: モデル 7 最大固有値に属する固有ベクトル

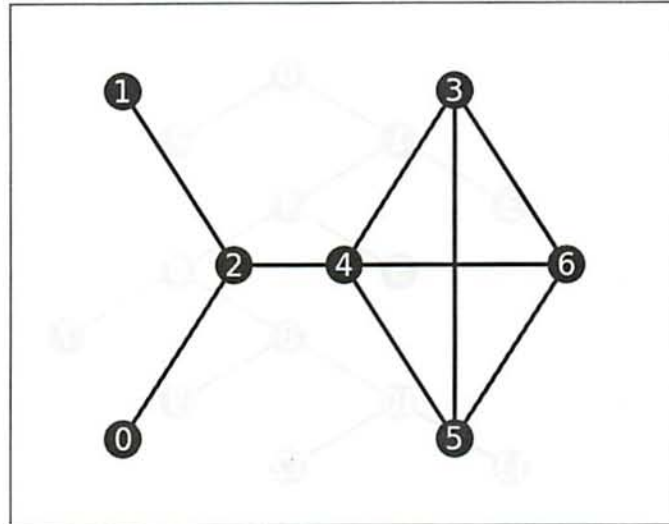


図 3.21: グラフモデル 8

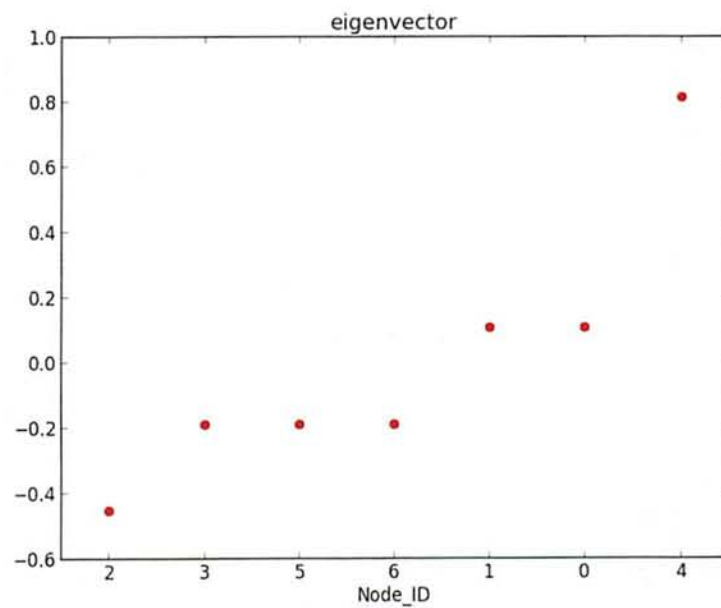


図 3.22: モデル 8 最大固有値に属する固有ベクトル

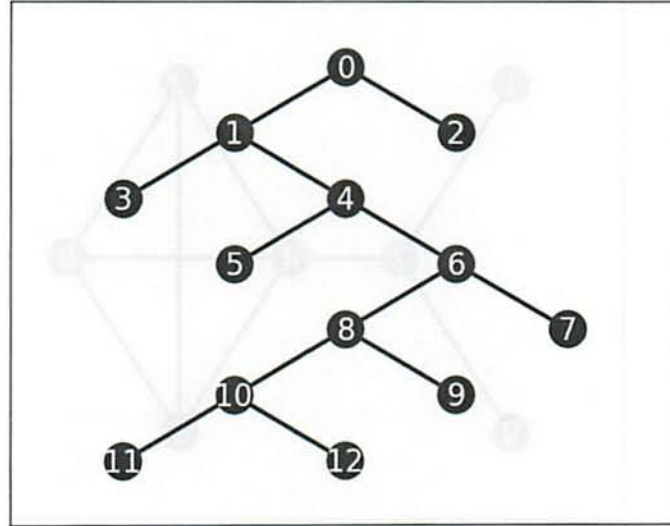


図 3.23: グラフモデル 9

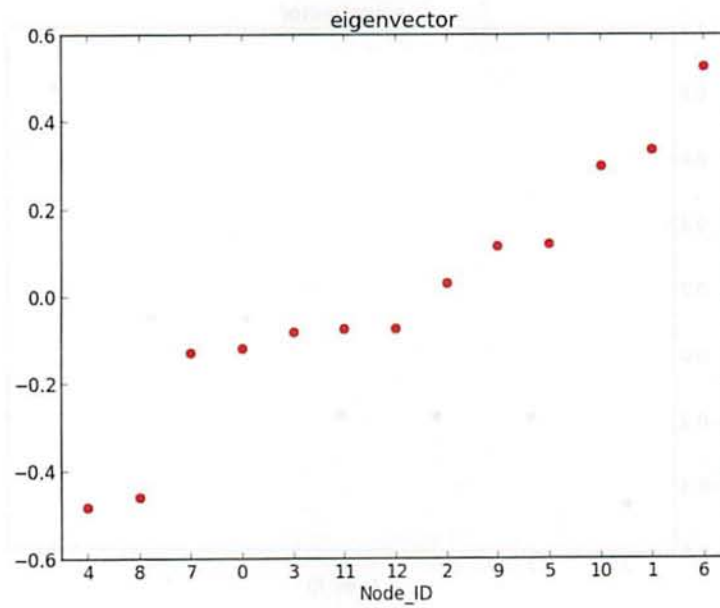


図 3.24: モデル 9 最大固有値に属する固有ベクトル

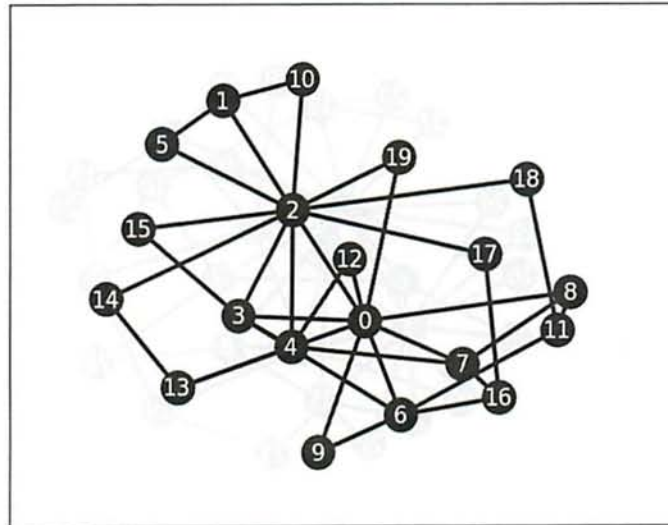


図 3.25: グラフモデル 10

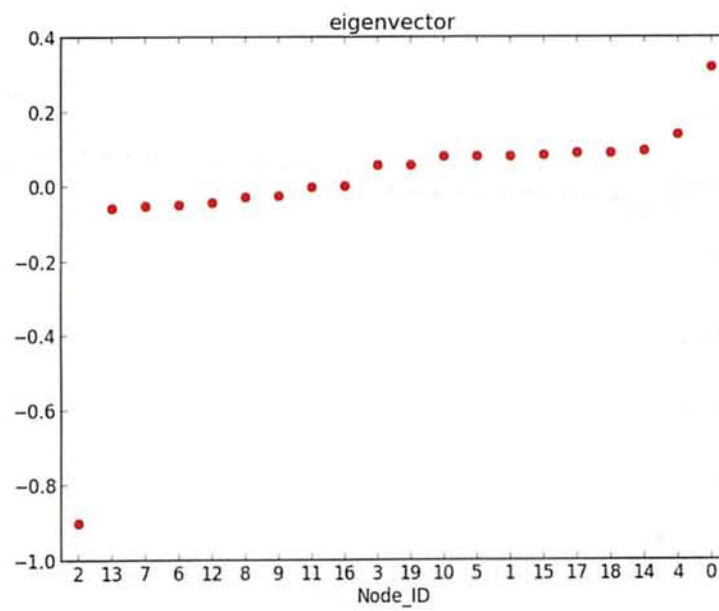


図 3.26: モデル 10 最大固有値に属する固有ベクトル

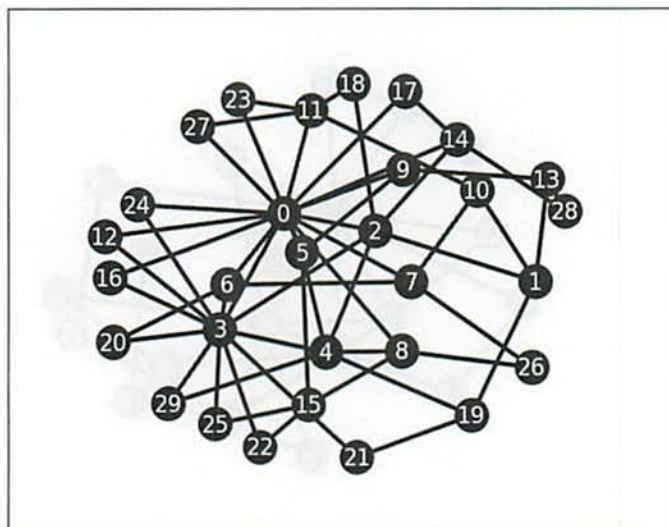


図 3.27: グラフモデル 11

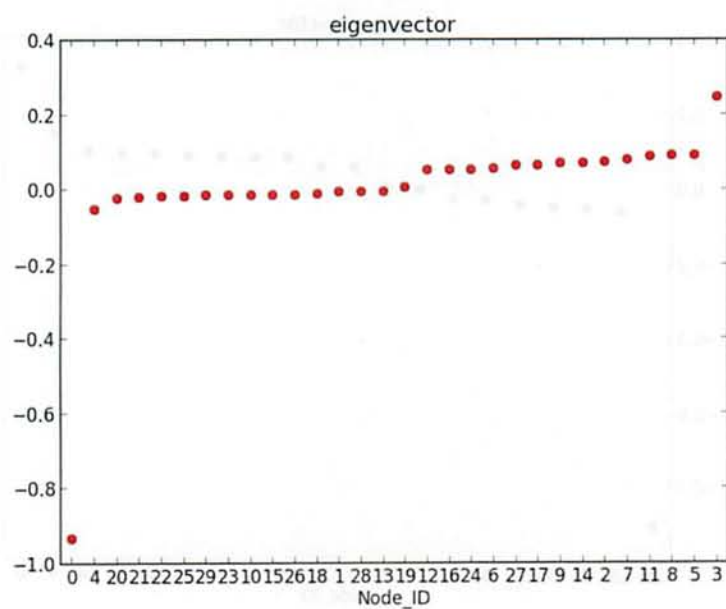


図 3.28: モデル 11 最大固有値に属する固有ベクトル

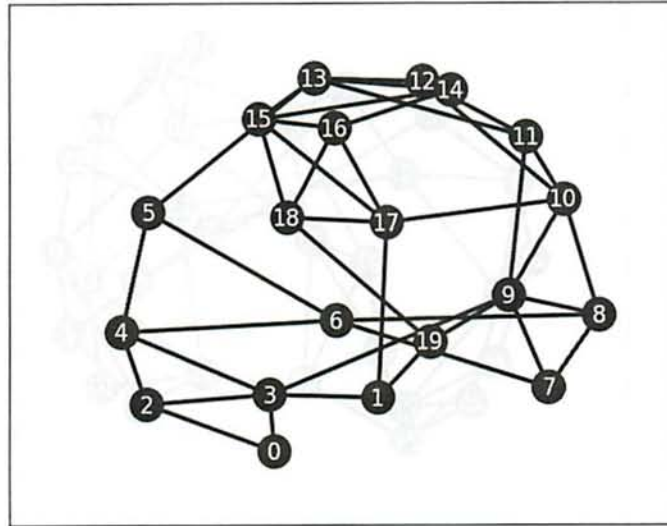


図 3.29: グラフモデル 12

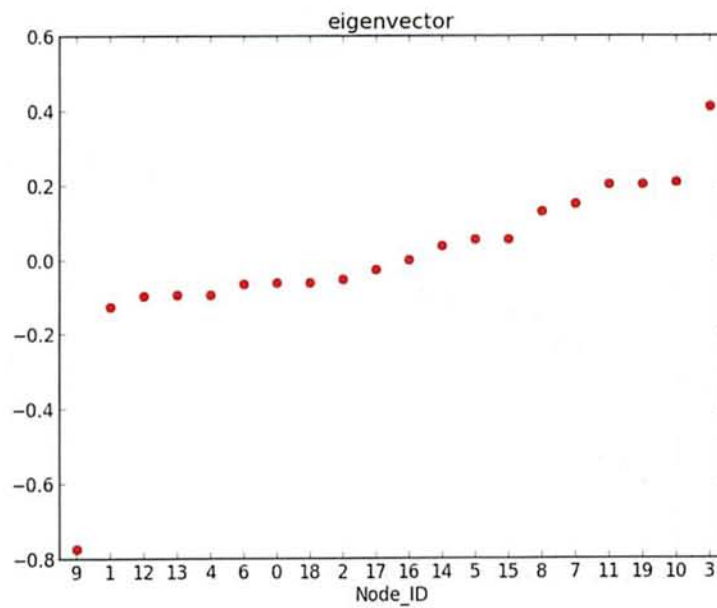


図 3.30: モデル 12 最大固有値に属する固有ベクトル

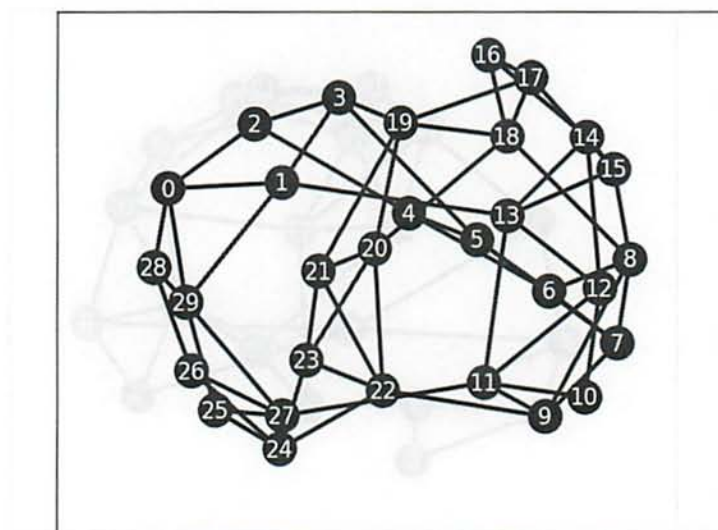


図 3.31: グラフモデル 13

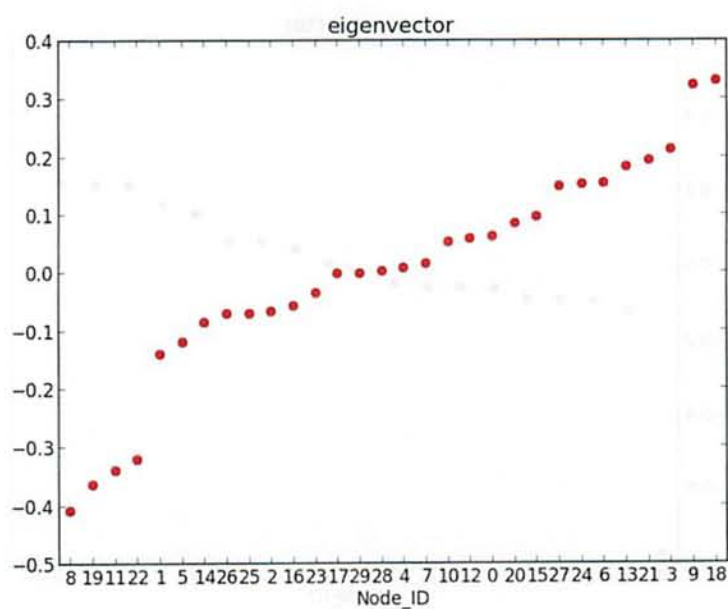


図 3.32: モデル 13 最大固有値に属する固有ベクトル

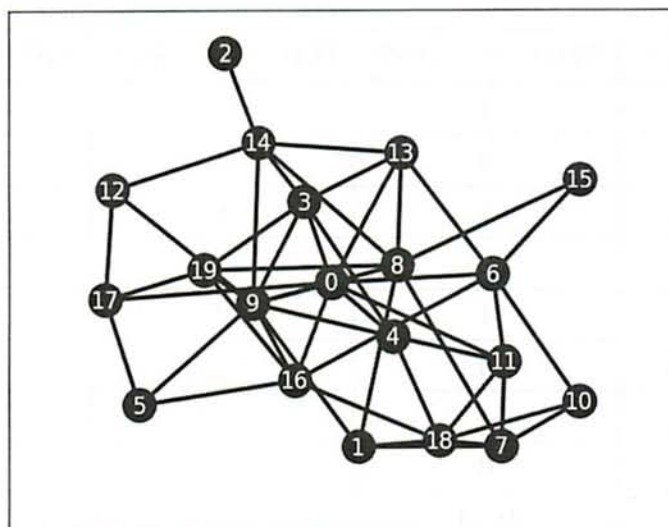


図 3.33: グラフモデル 14

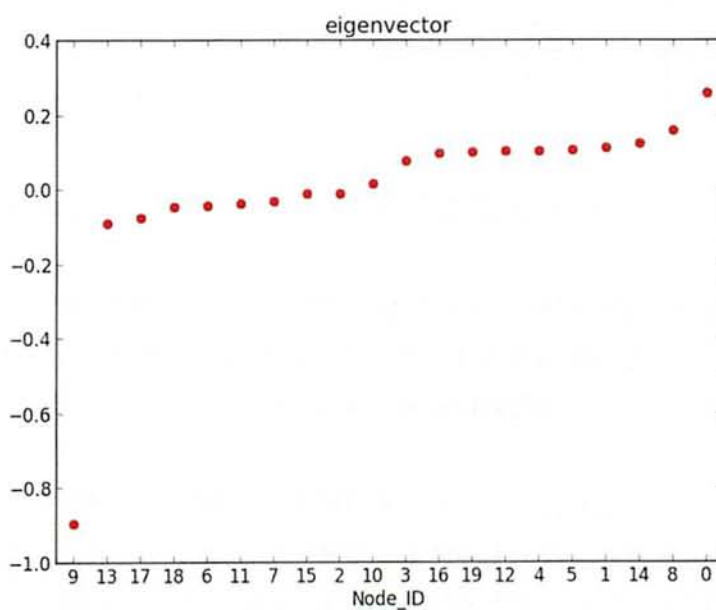


図 3.34: モデル 14 最大固有値に属する固有ベクトル

図 3.25～図 3.28 は、それぞれノード数 20 と 30 で生成した BA グラフである。図 3.25, 図 3.27 のグラフはどちらも次数分布が $P(k) \propto k^{-\alpha}$ ($\alpha = 2$) に従うよう生成した。さらに、図

表 3.1: 各グラフモデルの実験結果

グラフモデル	固有ベクトル最小	固有ベクトル最大	対応ノード間のリンク
1	1	2	有
1.2	3	4	有
1.3	7	8	有
2	2	1	有
3	1	2	有
4	6	1, 2	有
5	1	2	有
6	0	3	有
7	0, 4	1, 3	有
8	2	4	有
9	4	6	有
10	2	0	有
11	0	3	有
12	9	3	有
13	8	18	有
14	9	0	有

3.25 のノード 0 とノード 2, 図 3.27 のノード 0 とノード 3 はそれぞれのグラフのハブノード (最大次数ノード) である。

図 3.29～図 3.32 は, それぞれノード数 20 と 30 で生成した WS モデルである。図 3.29, 図 3.31 のグラフはどちらも初期次数 4 でリンクの張り替え確率 0.2 のパラメータで生成した。

図 3.33 はノード数 20, 2 点間の接続確率 0.3 のパラメータで生成したランダムグラフである。

どの実験結果においても固有ベクトル要素の最大と最小要素に対応するノード間にリンクが存在していることが確認できる。実験によって確認した全ての結果で, ラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトル要素の最大と最小に対応するノード間にリンクが存在することがいえる。

また, 本稿に示した実験よりノード数の大きい大規模グラフでの実験結果は確認済みではあるが, 結果を視覚的に分かりやすく確認するために適切でないこと, またその結果を視覚的に分かりやすく表示する方法はグラフのノード配置問題の領域であり, 本稿の目的とは外れるためノード数 30 以上でのグラフモデルでの実験結果は本稿では割愛する。

第4章

最大固有値に属する固有ベクトルと グラフ構造の関係に関する予想

本章では、第2章で述べたラプラシアン行列の二次形式と固有値とそれに属する固有ベクトルの対応関係を踏まえ、ラプラシアン行列の固有値が最大になるときの固有ベクトルの条件をパスグラフに対して証明する。

4.1 ラプラシアン行列の最大固有値に関する予想

第3章で、ラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルについて、その要素が最大と最小となる要素に対応するノード間にはリンクが存在している、という予想を実験によって確認した。

さらに、パスやツリーなどの循環しないグラフ構造においては固有ベクトル要素はグラフの中心から順に絶対値で大きくなる傾向もみられた。

また、BAモデルによって生成した図3.25、図3.27では生成アルゴリズムの性質より、ノード番号の小さいノードがハブになりやすい。ハブノードに対応するベクトル要素が絶対値で最大になることから、グラフの何か意味のある、なんらかの中心的な指標を多くもつノードがラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルの最大、最小値として表れると考えられる。

次節では、「ラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルについて、その要素が最大と最小となる要素に対応するノード間にはリンクが存在している。」という予想を最も単純なグラフ構造であるパスグラフを用いて証明した。

4.2 パスグラフにおけるラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトル

式 (2.9) のラプラシアン行列の二次形式と固有値の関係と第 2.3 節より関数 $F(\{x_i\})$ を最大にする重み x_i の配置問題をパスグラフで考える.

今, それぞれ重みを与えられた $2n$ 個のノードからパスグラフを作ること考える. パスグラフの重みはグラフの対称性から重みの正負によって図 4.1 のような 2 つの集合に分けることができる. 正の重みを x_i ($i = 1, 2, \dots, n$), 負の重みを y_i ($i = 1, 2, \dots, n$) とする. 正の重みノードの集合を $V_x = \{x_1, x_2, \dots, x_n\}$ 負の重みノードの集合を $V_y = \{-y_1, -y_2, \dots, -y_n\}$ とする.

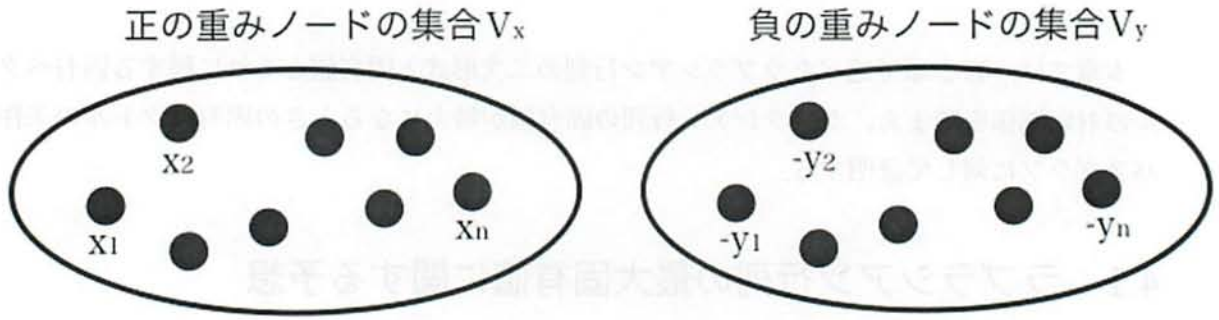


図 4.1: 重み付きノードの集合

ノードの重みの大小関係は以下のように決めておく.

$$x_1 \geq x_2 \geq x_3 \geq \dots \geq x_{n-1} \geq 0$$

$$y_1 \geq y_2 \geq y_3 \geq \dots \geq y_{n-1} \geq 0$$

2 つの集合のいずれかから 1 つずつノードを選択していき, 図 4.2 のようにパスグラフを拡張して作ること考える.

(1) ノード数 2 のとき

関数 $F(\{x_i, y_i\})$ を最大にするノードの選び方は明らかに重みの最大と最小の x_1 と $-y_1$ の組み合わせである. 図 4.3, そのとき

$$F(\{x_i, y_i\}) = (x_1 - (-y_1))^2 \quad (4.1)$$

(2) ノード数 3 のとき

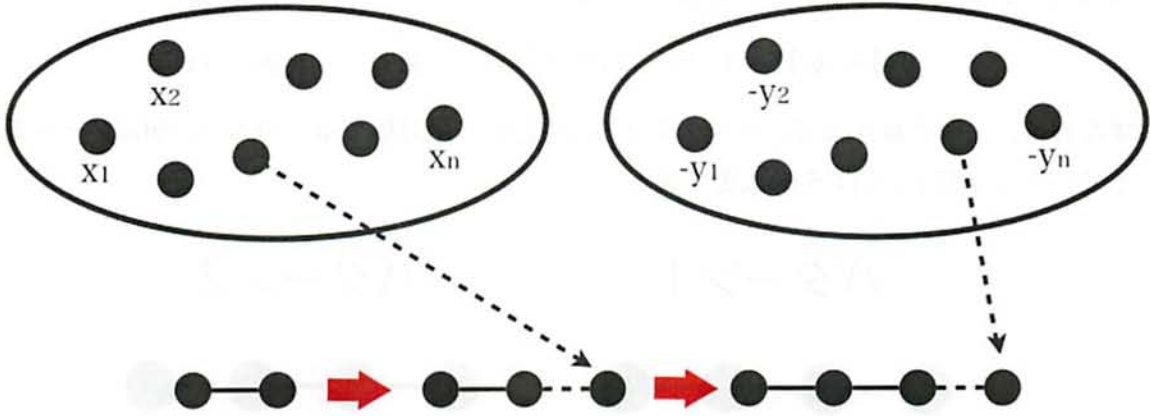


図 4.2: パスグラフの作成イメージ

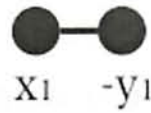


図 4.3: ノード数 2 の重みの差の自乗和最大配置

ノードの選び方は残りのノードの中で重みが最大か最小のノードのいずれかで，仮に図 4.4 の左側のように V_x からノードを選択し，最大の重み x_2 のノードを先に加えるとするとき

$$F(\{x_i, y_i\}) = (x_1 - (-y_1))^2 + (-y_1 - x_2)^2 \quad (4.2)$$



図 4.4: ノード数 3 の重みの差の自乗和最大配置検討

(3) ノード数 4 のとき

ノードを加える場所は図 4.5 の 2 通り考えられる． $x_1 \geq x_2$ より x_1 側に加えてパスグラフを拡張した方が加えるノード関係なく $F(\{x_i\})$ をより大きくする．さらにノードの選択の仕

方は明らかに残りのノードの中で重みが最小の $-y_2$ のノードを選んだときである。そのとき

$$F(\{x_i, y_i\}) = (-y_2 - x_1)^2 + (x_1 - (-y_1))^2 + (-y_1 - x_2)^2 \quad (4.3)$$

すなわち、ノード数4までのパスグラフでは中心から絶対値で重みの大きい順にノードを配置していくと $F(\{x_i, y_i\})$ を最大化できる。

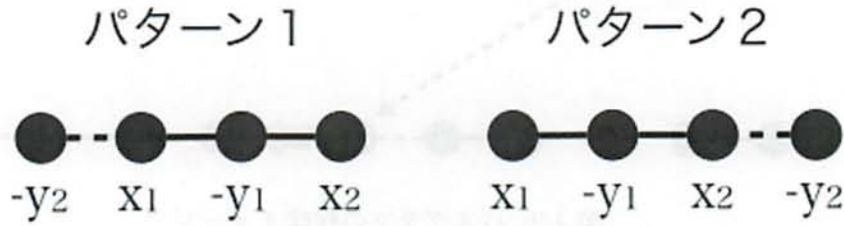


図 4.5: ノード数4の重みの差の自乗和最大配置検討

(4) ノード数5のとき

(2) のときと同様に残りのノードを V_x から選択し、最大の重み x_3 のノードを加えるとする。また、(3) よりノード数4では重みを中心から絶対値で大きい順に配置した方が最大になるので、考えるべき重みの差の自乗和を最大化する配置は図 4.6 の2通りに絞られる。図 4.6 のパターン1、パターン2の配置のときの重みの差の自乗和をそれぞれ F_1 F_2 とし、2つの配置パターンのときの関数を比較する。

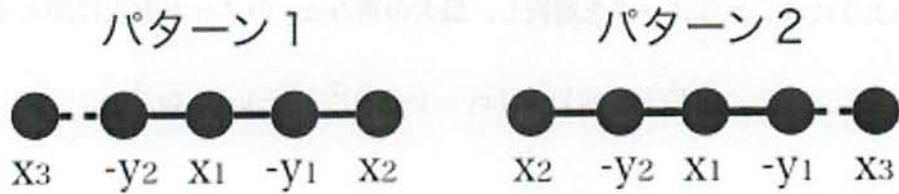


図 4.6: ノード数5の重みの差の自乗和最大配置検討

$$F_1 = (x_3 - (-y_2))^2 + (-y_2 - x_1)^2 + (x_1 - (-y_1))^2 + (-y_1 - x_2)^2$$

$$F_2 = (x_2 - (-y_2))^2 + (-y_2 - x_1)^2 + (x_1 - (-y_1))^2 + (-y_1 - x_3)^2$$

差をとると

$$\begin{aligned}
 F_1 - F_2 &= 2\{(x_3y_2 + x_2y_1) - (x_2y_2 + x_3y_1)\} \\
 &= 2\{x_2(y_1 - y_2) + x_3(y_2 - y_1)\} \\
 &= 2\{(y_1 - y_2)(x_2 - x_3) \geq 0
 \end{aligned} \quad (4.4)$$

よって、ノード数 5 のとき、図 4.6 のパターン 1 の配置のとき、すなわち中心から絶対値で重みの大きい順にノードを配置すると $F(\{x_i, y_i\})$ を最大化できる.

(5) ノード数 6 のとき

(3), (4) の結果からノードを加える場所は図 4.7, 加えるノードは $-y_3$ に決まり, そのとき $F(\{x_i, y_i\})$ を最大化できる.

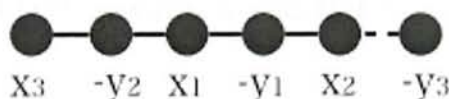


図 4.7: ノード数 6 の重みの差の自乗和最大配置

(6) ノード数 $2k$ のとき

中心から絶対値で重みの大きい順にノードを配置すると $F(\{x_i, y_i\})$ を最大化できると仮定する. 図 4.8

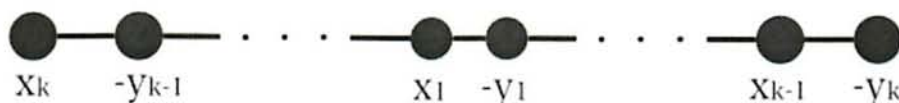


図 4.8: ノード数 $2k$ の重みの差の自乗和最大配置

(7) ノード数 $2k+1$ のとき

加えるノードを残りのノードの中から最大の重み x_{k+1} を加えるとする, (4) のときと同様の議論から

$$F_1 - F_2 = 2\{(y_{k-1} - y_k)(x_k - x_{k+1})\} \geq 0 \quad (4.5)$$



図 4.9: ノード数 $2k+1$ の重みの差の自乗和最大配置

(8) ノード数 $2k+2$ のとき

(6), (7) の結果からノードを加える場所は図 4.10, 加えるノードは $-y_{k+1}$ に決まる.

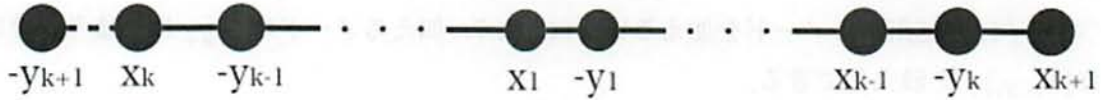


図 4.10: ノード数 $2k+2$ の重みの差の自乗和最大配置

(6)~(8) より, ノード数 n のとき中心から絶対値で重みの大きい順にノードを配置したとき各隣接ノードの重みの差の自乗和 $F(\{x_i, y_i\})$ が最大になる.

以上により, パスグラフにおいてはラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルについて, 最大と最小要素に対応するノード間にはリンクが存在しているが示された.

第5章

結論

本稿ではラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルとグラフ構造の関係性について分析し、「ラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルについて、その要素が最大と最小となる要素に対応するノード間にはリンクが存在している」という予想を様々なトポロジに対する実験とパスグラフ構造による証明により明らかにした。まず、実験によって様々なノード数、トポロジのグラフを生成し、各グラフのラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルとの比較、分析を行った。その結果、最大固有値に属する固有ベクトル要素の最大値と最小値に対応するノードの間にはリンクが存在することを実験的試行によって明らかにした。さらにパスグラフを用いて、ラプラシアン行列の二次形式と固有値問題を関連付け、グラフの各隣接ノード間の重みの差の自乗和を考えることでパスグラフにおいて重みの差の自乗和を最大にする最適な重みの配置について明らかにした。

先行研究で行われていたラプラシアン行列の小さな固有値やそれに属する固有ベクトルとグラフ構造との関係の理解が進んでいた一方で、大きな固有値とそれに属する固有ベクトルとグラフ構造との関係の理解が不十分であった。本稿では、ラプラシアン行列の大きな固有値とそれに属する固有ベクトルとグラフ構造との理解を進めた。

また、今後はパスグラフ以外の限定的なトポロジだけでなく、循環がある格子状グラフやリング構造を含むような様々なトポロジで各ノードに対応する固有ベクトルの関係を明らかにすること、ラプラシアン行列の最大固有値に属する固有ベクトルの最大と最小要素に対応するノードはグラフ全体から見てどのような意味をもつノードに対応しているのかの調査を今後の課題とする。

謝辞

本研究をご指導いただき、最後まで研究者として未熟な私を暖かく見守っていただいた會田雅樹先生、毎週のゼミを通して的確なご指摘をしていただいた川島幸之助先生、ならびにシミュレーションなどのプログラミングに関する指導や日頃の研究相談に乗っていただいた作元雄輔先生に厚く御礼申し上げます。會田研究室で学んだことを今後の人生の糧として精進していきたいと思います。また審査委員を務めていただきました朝香卓也先生、ならび飯村清明先生に感謝を申し上げます。最後に、會田研究室で共に研究し、苦楽を共にした同期のメンバー、卒業されていった先輩方、現存の後輩の皆様に、この場を借りて深く御礼申し上げます。3年間本当にありがとうございました。

参考文献

- [1] 会田雅樹, 高野知佐, 小頭秀行, 中村元 “異なる通信サービスのデータを相補的に利用した社会ネットワークの構造分析,” 電子情報通信学会論文誌 B vol. 93, no. 10, pp. 1430–1444, 2010.
- [2] 増田直紀 “複雑ネットワークの研究動向について,” オペレーションズ・リサーチ: 経営の科学 vol. 53, no. 9, pp. 511–516, 2008.
- [3] J. M. Montoya, S. L. Pimm, and R. V. Solé *Nature*, vol. 442, no. 7100, pp. 259–264, 2006.
- [4] 安田雪 “構造分析,” 計測と制御 vol. 21, no. 3, pp. 350–357, 1982.
- [5] 戸田光彦, 山本吉宣 “社会ネットワーク分析: その理論的背景と尺度,” 行動計量学 vol. 21, no. 2, pp. 32–39, 1994.
- [6] 辻竜平 “社会的ネットワーク分析: その理論と分析の基盤,” 認知科学 vol. 8, no. 4, pp. 454–465, 2001.
- [7] 浦川肇 “スペクトル幾何学とグラフ理論,” 応用数理 vol. 12, no. 1, pp. 29–45, 2002.
- [8] アルバート＝ラズロ・バラバシ, 「新ネットワーク思考ー世界のしくみを読み解く」 青木薫訳, NHK 出版, 2002.
- [9] 増田直樹, 今野紀雄 「複雑ネットワークー基礎から応用まで」 近代科学社 2010.
- [10] P. Erdos, and R. Renyi, “On random graphs I,” *Publ. Math. Debrecen*, vol. 6, pp. 290–297, 1959.
- [11] Stanley Milgram, “The small world problem,” *Psychology Today*, vol. 2, pp. 60–67, 1967.
- [12] Mark Granovetter, “The Strength of Weak Ties,” *American Journal of Sociology*, vol. 78, no. 6, pp. 1360–1380, 1973.
- [13] D. J. Watts, and S. H. Strogatz, “Collective dynamics of ‘small-world’ networks,” *Nature*, vol. 393, no. 6684, pp. 440–442, 1998.
- [14] A. L. Barabasi, and R. Albert, “Emergence of scaling in random networks,” *science*, vol. 286, no. 5439, pp. 509–512, 1999.

- [15] D. A. Spielman: "Spectral graph theory," Chapter 18 of *Combinatorial Scientific Computing* (Eds. U. Naumann & O. Schenk), pp. 495–524, Chapman and Hall/CRC, 2012.
- [16] W. E. Donath, and A. J. Hoffman "Lower bounds for the partitioning of graphs," *IBM Journal of Research and Development*, vol. 17, no. 5, pp. 420–425, 1973.
- [17] Miroslav Fiedler, "Algebraic connectivity of graphs," *Czechoslovak Mathematical Journal*, vol. 23, no. 2, pp. 298–305, 1973.
- [18] Miroslav Fiedler, "Eigenvectors of acyclic matrices," *Czechoslovak Mathematical Journal*, vol. 25, no. 4, pp. 607–618, 1975.
- [19] Miroslav Fiedler, "A property of eigenvectors of nonnegative symmetric matrices and its application to graph theory," *Czechoslovak Mathematical Journal*, vol. 25, no. 4, pp. 619–633, 1975.
- [20] D. A. Spielman, and S. H. Teng "Spectral partitioning works: Planar graphs and finite element meshes," *Linear Algebra and its Applications*, vol. 421, no. 2, pp. 284–305, 2007.
- [21] 山本聡彦, 生天目章 "進化手法による最適同期ネットワークの設計," 研究報告数理モデル化と問題解決 (MPS) vol. 2009, no. 10, pp. 1–9, 2009.
- [22] P. J. Burtn, and E. H. Adelson. "The Laplacian pyramid as a compact image code," *Communications, IEEE Transactions on* vol. 31, no. 4, pp. 532–540, 1983.
- [23] M. Belkin, and P. Niyogi. "Laplacian eigenmaps for dimensionality reduction and data representation," *Neural computation* vol. 15, no. 6, pp. 1373–1396, 2003.
- [24] 森本哲郎, 三橋徹, 池内克史 "Normalized Cut 法を用いた分光情報に基づく色復元," *The Journal of The Institute of Image Information and Television Engineers* vol. 62, no. 9, pp. 1453–1460, 2008.